MSC 82B20

ОЦЕНКА БЛИЗОСТИ ГАМИЛЬТОНИАНОВ ВЕКТОРНЫХ РЕШЕТОЧНЫХ МОДЕЛЕЙ СО СВОБОДНЫМИ И ПЕРИОДИЧЕСКИМИ ГРАНИЧНЫМИ УСЛОВИЯМИ

А.С. Клюев, Ю.П. Вирченко

Белгородский государственный университет,
ул. Студенческая, 14, 308007, г. Белгород, e-mail: virch@bsu.edu.ru

Аннотация. Устанавливается верхняя оценка для изменения матричных элементов гамильтониана векторной решеточной модели при введении в гамильтониан периодических граничных условий. Отношение этого изменения к объему системы стремится к нулю равномерно при термодинамическом предельном переходе.

Ключевые слова: векторная модель, гамильтониан, парное взаимодействие, периодические условия.

1. Введение. В предшествующей публикации (см. [1]) нами была поставлена задача об оценке близости основных состояний связанной пары решеточных моделей статистической механики классических систем: т.н. называемой векторной модели со свободными граничными условиями и соответствующей ей модели с периодическими граничными условиями. Такая задача возникает в связи с тем, что в статистической механике решеточных систем при изучении моделей, на состояния которых не накладывается никаких ограничений в виде их поведения вне заданной ограниченной области Λ фиксированной формы, часто применяется аппроксимация, при которой исходный гамильтониан H заменяется на связанный с ним гамильтониан $\tilde{\mathsf{H}}$ с периодическими граничными условиями (см. [2]). Аппроксимация на основе введения периодических граничных условий особенно эффективна, когда взаимодействие между узлами решетки обладает конечным радиусом. Между тем, если приходится оценивать близость не статистических характеристик системы статистической механики, а, наоборот, оценивать близость физически родственных состояний, которые переходят друг в друга при введении (снятии) возмущения гамильтониана посредством введения (снятия) периодических граничных условий, то оценки на ее величину становятся уже не столь очевидными. В частности, это справедливо при вычислении основного состояния конечной системы, когда совсем не очевидно, что аппроксимация исходного гамильтониана H системы, который физически не обладает конечным радиусом действия, некоторым гамильтонианом конечного радиуса действия, должна приводить к близости соответствующих состояний. В то же время, именно структура основного состояния имеет первостепенное значение при определении низкотемпературного поведения статистических характеристик системы. В сообщении [1] было введено понятие аппроксимирующей системы с периодическими граничными условиями в том случае, когда она не обладает конечным радиусом действия и была дана оценку близости энергий указанных систем. Здесь мы покажем в каком смысле гамильтонианы обоих рассматриваемых систем близки. Следует заметить, что решаемая здесь задача, ранее, в частном случае, была решена в работе [3].

2. Постановка задачи о близости основных состояний. Будем, далее, рассматривать системы статистической механики с пространством состояний

$$\mathfrak{S} = \bigotimes_{\mathbf{x}\in\Lambda}\{\mathbf{s}(\mathbf{x}) \in \mathbb{R}^n; \mathbf{s}^2(\mathbf{x}) = s^2\}\,; \quad n \in \mathbb{N}\,,$$

где $\Lambda \subset \mathbb{Z}^3$ – множество узлов решетки, являющееся геометрической моделью конечного кристалла [†], $|\Lambda| = N < \infty$. Для простоты рассмотрений, считаем, что $\Lambda = \{-(L-1), ... -1, 0, 1, ..., L-1\}^d$, $L \in \mathbb{N}$.

Гамильтониан векторной модели представляет собой функционал на $\mathfrak{S}$ следующего вида

$$\mathsf{H}_\Lambda[\mathbf{s}] = \frac{1}{2}\sum_{\mathbf{x},\mathbf{y}\in\Lambda} I(\mathbf{x}-\mathbf{y})\Big(\mathbf{s}(\mathbf{x}), \mathbf{s}(\mathbf{y})\Big)\,, \tag{1}$$

что соответствует при $n = 1, 2, 3$ моделям статистической механики, которые описывают системы взаимодействующих ионов, обладающих магнитным моментом s, со сферически симметричным обменным взаимодействием между ними, которое определяется обменным интегралом $I(\cdot)$. В формуле (1) функция $I : \mathbb{Z}^3 \mapsto \mathbb{R}$ обладает свойством $I(-\mathbf{x}) = I(\mathbf{x})$ и является суммируемой $\sum_{\mathbf{x}\in\mathbb{Z}^3} |I(\mathbf{x})| < \infty$ и, не ограничивая общности, можно считать, что $I(0) = 0$.

Зафиксируем множество Λ и на его основе определим для каждой точки $\mathbf{z} \in \mathbb{Z}^3$ действие оператора P_Λ проектирования. Точка $\mathbf{z}$ однозначно представима в виде $\mathbf{z} = 2L(n_1\mathbf{e}_1 + n_2\mathbf{e}_2 + n_3\mathbf{e}_3) + \mathbf{y}$, $\mathbf{y} \in \Lambda$, $\mathbf{e}_j$ – орты в $\mathbb{R}^3$, $(\mathbf{e}_j)_i = \delta_{ij}$. В этом случае положим $\mathsf{P}_\Lambda\mathbf{z} = \mathbf{y}$.

Гамильтониан $\tilde{\mathsf{H}}_\Lambda[\mathbf{s}]$, определяемый формулой

$$\tilde{\mathsf{H}}_\Lambda[\mathbf{s}] = \frac{1}{2}\sum_{\mathbf{x}\in\Lambda,\, \mathbf{y}\in\mathbb{Z}^d} I(\mathbf{x}-\mathbf{y})\Big(\mathbf{s}(\mathbf{x}), \mathbf{s}(\mathsf{P}_\Lambda\mathbf{y})\Big)\,, \tag{2}$$

назовем гамильтонианом с периодическими граничными условиями, соответствующим гамильтониану $\mathsf{H}_\Lambda[\mathbf{s}]$.

Определение основных состояний гамильтонианов (1) и (2), то есть полей $\mathbf{s}(\mathbf{x})$ и $\tilde{\mathbf{s}}(\mathbf{x})$, $\mathbf{x} \in \Lambda$, реализующих минимум каждого из функционалов, сводится к решению задач на условный экстремум, соответственно, для функционалов $\mathsf{H}_\Lambda[\cdot]$ и $\tilde{\mathsf{H}}_\Lambda[\cdot]$ с большой совокупностью условий $\mathbf{s}^2(\mathbf{x}) = s^2$, $\mathbf{x} \in \Lambda$. Большое число условий, которым нужно удовлетворить, к тому же неограниченно возрастающее при расширении Λ, то есть при переходе к термодинамическому пределу, делает применение стандартного метода решения задач на условный экстремум крайне затруднительным. Выход из создавшегося

[†] Изучение важного, с точки зрения статистической механики, случая двумерной системы, с точки зрения ответа на поставленный в настоящем сообщении вопрос, проводится теми же построениями.

положения связан с решением «ослабленной» задачи на условный экстремум с только одним условием, когда фиксируется не длина каждого отдельного вектора $\mathbf{s}(\mathbf{x})$, $\mathbf{x} \in \Lambda$, а сумма их квадратов, с последующей проверкой того, что найденное решение автоматически удовлетворяет указанной всей большой совокупности условий. Совсем необязательно, что такой путь решения задачи должен привести к поставленной цели, однако в уже исследованных ранее случаях (см. по этому поводу [4]), он оказался эффективным.

Итак, рассмотрим ослабленную задачу определения условного экстремума для функционалов $\mathsf{H}_\Lambda[\cdot]$ и $\tilde{\mathsf{H}}_\Lambda[\cdot]$ с условием

$$\sum_{\mathbf{x}\in\Lambda} \mathbf{s}^2(\mathbf{x}) = s^2 \,. \tag{3}$$

Как известно, такая задача сводится к определению безусловного экстремума для расширенных функционалов, соответственно,

$$\mathsf{H}_\Lambda[\mathbf{s}] - \frac{\lambda}{2}\sum_{\mathbf{x}\in\Lambda} \mathbf{s}^2(\mathbf{x}) \quad \text{и} \quad \tilde{\mathsf{H}}_\Lambda[\mathbf{s}] - \frac{\lambda}{2}\sum_{\mathbf{x}\in\Lambda} \mathbf{s}^2(\mathbf{x})$$

с неопределенным множителем Лагранжа λ. Так как функционалы $\mathsf{H}_\Lambda[\cdot]$ и $\tilde{\mathsf{H}}_\Lambda[\cdot]$ – квадратичные, то экстремальные поля $\mathbf{s}(\mathbf{x})$ и $\tilde{\mathbf{s}}(\mathbf{x})$ являются решениями линейных уравнений

$$\frac{\partial \mathsf{H}_\Lambda[\mathbf{s}]}{\partial \mathbf{s}(\mathbf{x})} = \lambda \mathbf{s}(\mathbf{x})\,, \qquad \frac{\partial \tilde{\mathsf{H}}_\Lambda[\tilde{\mathbf{s}}]}{\partial \tilde{\mathbf{s}}(\mathbf{x})} = \lambda \tilde{\mathbf{s}}(\mathbf{x})$$

или, что то же самое,

$$\sum_{\mathbf{y}\in\Lambda} I(\mathbf{x}-\mathbf{y})\mathbf{s}(\mathbf{y}) = \lambda \mathbf{s}(\mathbf{x})\,, \qquad \sum_{\mathbf{y}\in\mathbb{Z}^3} I(\mathbf{x}-\mathbf{y})\tilde{\mathbf{s}}(\mathsf{P}_\Lambda \mathbf{y}) = \lambda \tilde{\mathbf{s}}(\mathbf{x})\,,$$

то есть они являются собственными функциями с соответствующими собственными значениями интегральных операторов

$$\big(\hat{\mathsf{H}}_\Lambda \mathbf{s}\big)(\mathbf{x}) = \sum_{\mathbf{y}\in\Lambda} I(\mathbf{x}-\mathbf{y})\mathbf{s}(\mathbf{y})\,, \qquad \big(\hat{\tilde{\mathsf{H}}}_\Lambda \tilde{\mathbf{s}}\big)(\mathbf{x}) = \sum_{\mathbf{y}\in\Lambda} I(\mathbf{x}-\mathbf{y})\tilde{\mathbf{s}}(\mathsf{P}_\Lambda \mathbf{y})$$

на пространстве $\mathbb{L}_2\Big(\big(\mathbb{R}^3\big)^\Lambda\Big)$. Тогда задача об оценке близости основных состояний связана с оценкой матричных элементов разности операторов $\mathsf{V} = \hat{\tilde{\mathsf{H}}}_\Lambda - \hat{\mathsf{H}}_\Lambda$ в этом пространстве, где

$$\big(\mathsf{V}\mathbf{s}\big)(\mathbf{x}) = \sum_{\mathbf{y}\in\mathbb{Z}^3\setminus\Lambda} I(\mathbf{x}-\mathbf{y})\mathbf{s}(\mathsf{P}_\Lambda \mathbf{y})\,. \tag{4}$$

3. Оценка матричных элементов оператора V. Результат, который мы предлагаем в этом сообщении, формулируется следующим образом.

Теорема. *Для оператора V с обменной функцией $I(\cdot)$, которая обладает свойством*

$$\sum_{\mathbf{x}\in\mathbb{Z}^3} |I(\mathbf{x})| < \infty\,, \tag{5}$$

при термодинамическом предельном переходе $\Lambda \to \mathbb{Z}^3$, *имеет место предельное соотношение*

$$\lim_{\Lambda \to \mathbb{Z}^3} \frac{1}{|\Lambda|^{1/2}} \sum_{\mathbf{x}\in\Lambda} \left|\left(\mathsf{Vs}\right)(\mathbf{x})\right| = 0\,, \tag{6}$$

где $|\Lambda| = (2L-1)^3$ – *число узлов в* Λ.

□ Из (4) следует, что

$$\left(\mathsf{Vs}\right)(\mathbf{x}) = \sum_{\mathbf{y}\in\mathbb{Z}^3\setminus\Lambda} I(\mathbf{x}-\mathbf{y})\mathsf{s}(\mathsf{P}_\Lambda \mathbf{y})\,.$$

Тогда

$$\sum_{\mathbf{x}\in\Lambda} \left|\left(\mathsf{Vs}\right)(\mathbf{x})\right| \le \sum_{\mathbf{x}\in\Lambda} \Big(\sum_{\mathbf{z}\ne 0} \sum_{\mathbf{y}\in\Lambda} |I(\mathbf{x}+2L\mathbf{z}-\mathbf{y})|\,|\mathsf{s}(\mathbf{y})| \Big) \le$$

$$\le \sum_{\mathbf{y}\in\Lambda} |\mathsf{s}(\mathbf{y})| \Big(\sum_{\mathbf{z}\ne 0} \sum_{\mathbf{x}\in\Lambda} |I(\mathbf{x}+2L\mathbf{z}-\mathbf{y})| \Big)\,.$$

Отсюда, используя неравенство Коши-Буняковского,

$$\Big[\sum_{\mathbf{x}\in\Lambda} \left|\left(\mathsf{Vs}\right)(\mathbf{x})\right|\Big]^2 \le \Big[\sum_{\mathbf{y}\in\Lambda} |\mathsf{s}(\mathbf{y})|^2\Big] \Big[\sum_{\mathbf{y}\in\Lambda} \Big(\sum_{\mathbf{z}\ne 0} \sum_{\mathbf{x}\in\Lambda} |I(\mathbf{x}+2L\mathbf{z}-\mathbf{y})| \Big)^2\Big] =$$

$$= \Big[\sum_{\mathbf{y}\in\Lambda} |\mathsf{s}(\mathbf{y})|^2\Big] \Big[\sum_{\mathbf{y}\in\Lambda} \Big(\sum_{\mathbf{x}\in\mathbb{Z}^3\setminus\Lambda} |I(\mathbf{x}-\mathbf{y})| \Big)^2\Big] \equiv V^2 \Big[\sum_{\mathbf{y}\in\Lambda} |\mathsf{s}(\mathbf{y})|^2\Big]\,,$$

где

$$V^2 = \sum_{\mathbf{y}\in\Lambda} \Big(\sum_{\mathbf{z}\in\mathbb{Z}^3\setminus\Lambda-\mathbf{y}} |I(\mathbf{z})| \Big)^2\,.$$

Таким образом, достаточно доказать, что при $L \to \infty$ имеет место предельное соотношение $|\Lambda|^{-1}V^2 \to 0$.

Возьмем произвольные положительные числа ε и $\alpha < 1$ и разобьем внешнюю сумму в выражении для V^2 на две части

$$\sum_{\mathbf{y}\in\Lambda} \ldots = \sum_{\mathbf{y}\in\Lambda\,:\,\max|y_j|<\alpha L} \ldots + \sum_{\mathbf{y}\in\Lambda\,:\,\max|y_j|\ge\alpha L} \ldots \tag{7}$$

Для $\mathbf{y} \in \Lambda$ с компонентами y_j, для которых $\max|y_j| \ge \alpha L$, внутреннюю сумму оценим сверху посредством конечной величины (5),

$$\sum_{\mathbf{z}\in\mathbb{Z}^3\setminus\Lambda-\mathbf{y}} |I(\mathbf{z})| \le \sum_{\mathbf{z}\in\mathbb{Z}^3} |I(\mathbf{z})|\,.$$

Тогда вторая сумма в (7) оценивается следующим образом:

$$\sum_{\mathbf{y}\in\Lambda\,:\,\max|y_j|\ge\alpha L} \quad \sum_{\mathbf{z}\in\mathbb{Z}^3\setminus\Lambda-\mathbf{y}} |I(\mathbf{z})| \le (2L)^3(1-\alpha^3)\Big[\sum_{\mathbf{z}\in\mathbb{Z}^3} |I(\mathbf{z})|\Big]^2\,.$$

Ввиду наличия у функции $I(\cdot)$ свойства (5), имеет место предельное соотношение

$$\lim_{M\to\infty}\sum_{\mathbf{z}\,:\,\max|z_j|\ge M}|I(\mathbf{z})|=0\,.$$

Тогда, при фиксированном значении α, для любого $\varepsilon>0$, найдется такое M, для которого имеет место неравенство

$$\sum_{\mathbf{z}\,:\,\max|z_j|\ge(1-\alpha)L}|I(\mathbf{z})|<\varepsilon$$

при $L>M/(1-\alpha)$. Так как для векторов $\mathbf{y}$ с компонентами y_j, у которых $\max|y_j|<\alpha L$ имеет место

$$\sum_{\mathbf{z}\in\mathbb{Z}^3\setminus\Lambda-\mathbf{y}}|I(\mathbf{z})|<\sum_{\mathbf{z}\in\mathbb{Z}^3\setminus(1-\alpha)\Lambda}|I(\mathbf{z})|<\varepsilon\,.$$

Тогда первая сумма в (7) оценивается сверху как

$$\sum_{\mathbf{y}\in\Lambda\,:\,\max|y_j|<\alpha L}\quad\sum_{\mathbf{z}\in\mathbb{Z}^3\setminus\Lambda-\mathbf{y}}|I(\mathbf{z})|<(2\alpha L)^3\varepsilon^2\,.$$

Следовательно, для величины V^2 имеем оценку сверху

$$V^2<(2\alpha L)^3\varepsilon^2+(2L)^3(1-\alpha^3)\Big[\sum_{\mathbf{z}\in\mathbb{Z}^3}|I(\mathbf{z})|\Big]^2\,.$$

Так как $|\Lambda|=(2L-1)^3$, то

$$\lim_{L\to\infty}\frac{V^2}{|\Lambda|}\le\alpha^3\varepsilon^2+(1-\alpha^3)\Big[\sum_{\mathbf{z}\in\mathbb{Z}^3}|I(\mathbf{z})|\Big]^2\,.$$

Выбрав сначала число α достаточно близким к 1, а затем число ε достаточно малым, можно сделать правую часть неравенства сколь угодно малой. Следовательно, имеет место (7). ■

Литература

1. Клюев А.С., Вирченко Ю.П. Оценка энергии векторной решеточной модели с периодическими граничными условиями // Belgorod State University Scientific Bulletin. Mathematics & Physics. – 2015. – №11(208); 39. – С.121-125.
2. Ruelle D. Statistical Mechanics, Rigorous Results / Ney York-Amsterdam: W.A.Benjamin, Inc., 1969. (Рюэль Д. Статистическая механика. Строгие результаты / М.: Мир, 1971.)
3. Вирченко Ю.П. К теории основного состояния обменной модели Гейзенберга // Проблемы теоретической физики / Киев: Наукова думка, 1991. – С.80-96.
4. Клюев А.С., Вирченко Ю.П. Основное состояние векторной решеточной модели с парным взаимодействием. Случай вырожденного обменного интеграла // Belgorod State University Scientific. Bulletin Mathematics & Physics. – 2014. – 5(176);34. – С.126-133.

CLOSENESS ESTIMATE OF HAMILTONIANS OF VECTOR LATTICE MODELS WITH FREE AND PERIODIC BOUNDARY CONDITIONS

A.S. Klyuyev, Yu.P. Virchenko

Belgorod State University,
Studencheskaja St., 14, Belgorod, 308007, Russia, e-mail: virch@bsu.edu.ru

Abstract. It is proved the upper estimate of hamiltonian matrix elements change of lattice vector model when periodic conditions are introduced into hamiltonian. The ratio of the change relative to system volume tends uniformly to zero at thermodynamic limit.

Key words: vector model, hamiltonian, pair interaction, periodical boundary conditions.